

Проблема:

Интерес рассмотреть именно магические кластеры вызван их повышенной стабильностью, по сравнению с другими малыми кластерами. Создание графика плавления таких кластеров будет более ярко выражено и даст нам более глубокое понимание об изменении полной энергии атомов кластеров при их плавлении.

Задачи:

1. Взять кластеры с «магическим» числом атомов 7 и 19.
2. Исследовать в двумерной модели плавление этих малых кластеров.
3. Проследить за изменениями энергии атомов кластеров при изменении температуры, используя для этого соответствующие формулы.
4. Составить график изменений зависимости средней температуры от полной энергии одного атома.

Теоретическое описание:

Если говорить обобщенно, кластер – объединение нескольких однородных элементов, которое может рассматриваться как самостоятельная единица, обладающая определёнными свойствами.

Данный термин можно повстречать в контексте многих сфер, начиная с информационных технологий и заканчивая музыкой.

В химии, кластерами называют химические соединения, являющиеся промежуточными между молекулой и объемным твердым телом. Кластеры могут иметь различную стехиометрию и геометрическую структуру.

Как правило, формирование кластеров, например, при конденсации из газовой фазы – это стохастический процесс, в результате которого формируются кластеры разного размера. Под размером кластера принято понимать, скорее, число атомов, образующих кластер, чем его линейные размеры. Кластеры могут иметь размеры от единиц до сотен атомов, а формирующийся ансамбль кластеров обычно характеризуется достаточно широким распределением по размерам.

В некоторых системах кластеры, имеющие особые размеры, обладают повышенной стабильностью, в результате чего таких кластеров формируется существенно больше, чем кластеров других размеров. Такие кластеры часто называют магическими, так как число атомов в них не произвольное, а точно равно некоторому "магическому" числу. Классическим примером магических кластеров может служить семейство фуллеренов, включающее C₆₀, C₇₀, C₈₄. Для изучения кластерных соединений широко используется метод масс-спектрометрии.

Магические кластеры – кластеры определенных размеров, которые благодаря своей специфической структуре обладают повышенной стабильностью по сравнению с кластерами других размеров.

Описание модели:

Малые кластеры с магическим числом атомов. Будут сначала в охлажденном виде (низкая температура), потом будут нагреваться. По результатам наблюдений за их поведением во время нагрева будет составлен график.

Условия нормальные: давление $p = 0,1013 \text{ МПа} = 760 \text{ мм рт. ст.}$ (нормальная атмосфера) и температурой $273,15 \text{ К}$ ($0 \text{ }^{\circ}\text{C}$).

Предположительно мы хотим работать с атомами металлов (например, железо, медь, алюминий и т. д.). Для построения модели мы хотим использовать язык Python.